

## Кроссовер Иоффе–Регеля и бозонные пики в неупорядоченных твердых растворах и аналогичные им аномалии в гетерогенных кристаллических структурах

И.А. Господарев, В.И. Гришаев, А.В. Котляр, К.В. Кравченко,  
Е.В. Манжелей, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины  
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина  
E-mail: gospodarev@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 11 марта 2008 г.

На микроскопическом уровне проанализированы низкочастотные особенности фононных спектров неупорядоченных твердых растворов и гетерогенных кристаллических структур. Показана возможность возникновения возбуждений типа бозонных пиков в неупорядоченных твердых растворах, узлы которых имеют только трансляционные степени свободы. Таким образом, установлено, что основной причиной возникновения таких возбуждений является обусловленная разупорядочением дополнительная положительная дисперсия звуковых волн. Исследовано влияние возбуждений типа бозонных максимумов на низкотемпературную теплоемкость. Установлено, что в ряде случаев теплоемкость является более чувствительной к возбуждениям такого рода, чем низкочастотная плотность состояний. Показано, что аномалии, подобные кроссоверу Иоффе–Регеля и бозонному пику, могут возникать также и в упорядоченных гетерогенных кристаллических структурах со сложной решеткой.

На мікроскопічному рівні проаналізовано низькочастотні особливості фононних спектрів неупорядкованих твердих розчинів і гетерогенних кристалічних структур. Показано можливість виникнення збуджень типу бозонних піків у неупорядкованих твердих розчинах, вузли яких мають тільки трансляційні ступені свободи. Таким чином, встановлено, що основною причиною виникнення таких збуджень є додаткова позитивна дисперсія звукових хвиль, яка обумовлена розупорядкуванням. Досліджено вплив збуджень типу бозонних максимумів на низькотемпературну теплоємність. Встановлено, що в ряді випадків теплоємність є більше чутливою до збуджень такого роду, ніж низькочастотна щільність станів. Показано, що аномалії, які подібні кроссоверу Іоффе–Регеля й бозонному піку, можуть виникати також і в упорядкованих гетерогенних кристалічних структурах зі складною ґраткою.

PACS: **63.20–e** Фононы в кристаллической решетке;  
**63.20.Mt** Взаимодействие фононов с дефектами;  
**63.22+m** Фононы в низкоразмерных структурах и малых частицах;  
**63.50+x** Колебательные состояния неупорядоченных систем.

Ключевые слова: кроссовер Иоффе–Регеля, бозонный пик, неупорядоченные твердые растворы, фонон, функция Грина.

### Введение

Различные нарушения кристаллической регулярности в расположении атомов приводят к существенному изменению фононных и других квазичастичных спектров, а также обусловленных ими термодинамических и кинетических характеристик. Начало систематическому теоретическому изучению свойств ре-

альных кристаллов и неупорядоченных систем было положено в работах И.М. Лифшица и его школы [1–4]. Многие особенности динамики содержащей дефекты кристаллической решетки к настоящему времени детально изучены и изложены в монографиях и учебниках, видное место среди которых занимают книги А.М. Косевича [5–7].

Несмотря на существенные успехи, достигнутые в исследовании систем с разными типами разупорядочения, и разработку общих подходов и методов их теоретического описания [4], изучение особенностей их фононных спектров (в частности низкочастотных) и связанных с ними низкотемпературных термодинамических характеристик остается исключительно важной и актуальной задачей современной физики твердого тела. Так, в последние годы повышенное внимание к себе привлекает изучение условий возникновения и свойств так называемого «бозонного пика», присущего фононным спектрам таких систем. Первоначально он был обнаружен в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов или света (рассеяние Мандельштама–Рамана) как максимум на частотной зависимости отношения плотности колебательных состояний  $g(\omega)$  (или интенсивности рассеяния  $I(\omega) \sim g(\omega)$ ) к квадрату частоты  $\omega^2$ ). Этот максимум проявляется в низкочастотной области колебательной плотности состояний в интервале частот между 0,5 и 2 ТГц [8], т.е. значительно ниже частоты Дебая. На самой функции  $g(\omega)$  максимум при этом не возникает [9].

Бозонные пики исследовали в дальнейшем также в экспериментах по неупругому рассеянию различных частиц [10–15]. Все это стимулировало появление большого числа теоретических работ по выяснению природы бозонного пика. Как аналитически, основываясь на различных предположениях о возникновении разупорядочения [16–29], так и методами компьютерного моделирования [30–36] изучали взаимодействие локальных дефектов, обеспечивающих разупорядочение, со звуковыми волнами. Одни исследователи связывали появление бозонного пика с возникновением в такой системе квазилокальных колебаний. Рассматривались также модели со случайным распределением гармонических силовых констант, что также (по мнению авторов) приводило к появлению аномалий типа бозонного пика. Положение этого пика соответствует той частоте, при которой параметр разупорядочения, понимаемый как расстояние, на котором акустические фононы распространяются со звуковой скоростью [37], становится сравнимым с длиной волны (предел Иоффе–Регеля [38]). В работе [37] кроссовер Иоффе–Регеля и возникновение бозонного пика трактовался с помощью численного моделирования как переход от так называемых «пропагонов» (быстро распространяющихся низкочастотных фононов с акустическим законом дисперсии) к «диффузорам» — фононам, чье распространение тормозится рассеянием на возникающих при более высоких частотах локализованных состояниях.

Особо следует отметить вклад А.М. Косевича в исследовании связи эффекта Иоффе–Регеля с возникновением бозонного пика [39,40]. В этих работах показана связь предела Иоффе–Регеля с эффектами,

основанными на взаимодействии быстро распространяющихся квазичастиц (типа акустических фононов) с более «медленными» квазичастицами. Такой кроссовер Иоффе–Регеля приводит к образованию характерных особенностей на фононной плотности, которые имеют вид, аналогичный виду первой особенности Ван Хофа в кристаллически упорядоченных системах, который, как известно [5–7], определяется размерностью решетки.

В работе [41] при исследовании аномалий в разупорядоченных системах использовали так называемую фонон-фрактальную модель [42] и модель логнормального распределения частот [43].

Однако, несмотря на обилие теоретических моделей, описывающих системы, в спектрах которых присутствует бозонный пик, и экспериментальных результатов по его наблюдению, устоявшееся мнение о природе этого пика до сих пор не выработано. Так, в работе [44], посвященной экспериментальному обнаружению бозонного пика у поверхности пористого кремния, прямо сказано, что, несмотря на многочисленные усилия, природа бозонного пика остается невыясненной. Практически такой же вывод содержится и в работе [45], в которой подчеркивается связь бозонного пика с первой особенностью Ван Хофа. Отметим также, что одно из возможных проявлений бозонного пика было экспериментально обнаружено в исследованиях изохорной теплопроводности молекулярных кристаллов [46].

Настоящая работа посвящена объяснению на микроскопическом уровне природы появления аномалий типа особенностей Иоффе–Регеля и бозонного пика в низкочастотной области фононного спектра неупорядоченных систем, которые состоят из частиц, обладающих только трансляционными степенями свободы. Продемонстрировано, что подобные аномалии возникают даже в упорядоченных гетерогенных кристаллических структурах, например в сильно анизотропных кристаллах со сложной решеткой. Показано также, что для наблюдения бозонного пика изучение термодинамических характеристик, таких как низкотемпературная теплоемкость и температурная зависимость температуры Дебая, в ряде случаев может оказаться даже более информативным, чем непосредственное изучение плотности состояний.

### 1. Температурная зависимость температуры Дебая как характеристика распространения акустических фононов

Хорошо известно, что дебаевское приближение основано на аппроксимации реального колебательного спектра кристалла фононами со звуковым законом дисперсии  $\omega = sk$  ( $s$  — скорость звука,  $k$  — модуль волнового вектора). Соответствующая плотность состояний имеет вид (см., например, [5–7])

$$g_D^{(q)}(\omega) = \frac{q\omega^{q-1}}{\omega_D^q}, \quad (1)$$

где  $q$  — размерность решетки. С ростом величины  $k$  закон дисперсии фононов в кристалле все сильнее уклоняется от линейного (частота  $\omega$  становится меньше, чем  $sk$ ) и реальная плотность состояний уклоняется от зависимости (1) вверх. Наконец, при некотором значении модуля волнового вектора  $k^*$  групповая скорость фононов какой-нибудь из поперечных акустических мод для одного из кристаллографических направлений обращается в нуль. Как правило, это направление совпадает с направлением одной из осей симметрии в  $\mathbf{k}$ -пространстве, а значение  $k^*$  соответствует границе первой зоны Бриллюэна в этом направлении. Таким образом, при частоте  $\omega^* = \omega(k^*)$  происходит переход от замкнутых изочастотных поверхностей к открытым и значение  $\omega^*$  есть частота первой особенности Ван Хова.

На рис. 1 представлены плотность состояний ГЦК кристаллической решетки с центральным взаимодействием ближайших соседей и зависимости от частоты групповых скоростей продольных и поперечных фононов вдоль высокосимметричных кристаллографических направлений ГХ, ГЛ и ГК (справа для удобства изображен первый октант первой зоны Бриллюэна ГЦК кристалла).

Видно, что дебаевская плотность состояний  $g_D^{(3)}(\omega)$ , определяемая формулой (1) при  $q = 3$  и изображенная на рисунке тонкой штриховой линией, достаточно удовлетворительно совпадает с истинной плотностью состояний при  $\omega \leq 0,25\omega_m$  ( $\omega_m$  — верхняя граница полосы квазинепрерывного спектра). При  $\omega > 0,25\omega_m$  кривая  $g(\omega)$  начинает отклоняться от кривой  $g_D^{(3)}(\omega)$  вверх. Особенность ван Хова соответствует обращению в нуль

групповой скорости фононов поперечных мод, распространяющихся вдоль направления ГЛ. Для данной модели частота  $\omega^* = \omega_m/2$ . При  $\omega \geq \omega^*$  характер дисперсии фононов меняется качественно. Наряду с быстро распространяющимися фононами, закон дисперсии которых еще близок к линейному (зависимость  $s(\omega)$ , как видно на рисунке, для остальных ветвей и направлений распространения при  $\omega \approx \omega^*$  сравнительно невелика), возникают локализованные состояния — вдоль направления ГЛ поперечные фононы больше не распространяются. Аналогично, при частоте  $\omega^{**} = \omega_m/\sqrt{2}$  (эйнштейновской частоте для рассматриваемой модели) прекращается распространение поперечных фононов вдоль направления ГХ. На интервале  $[\omega^*, \omega^{**}]$  плотность состояний  $g(\omega)$  имеет линейный вид, характерный для дебаевской плотности состояний двумерного кристалла  $g_D^{(2)}(\omega)$ . Это указывает на то, что распространение длинноволновых фононов при этих частотах имеет двумерный характер.

Отклонение фононной плотности от (1) приводит, естественно, к отличию температурной зависимости фононной теплоемкости от ее дебаевского вида  $C_D(T)$  (см., например, [5–7]). Причем это отличие будет тем сильнее, чем ниже частоты, при которых начинается такое отклонение. Обычно отклонение истинной фононной теплоемкости от  $C_D(T)$  описывается в виде температурной зависимости дебаевской температуры  $\Theta_D$ . Эта зависимость может быть найдена из transcendентного уравнения:

$$C_v(T) = C_D(T) \equiv 3R \left\{ D\left(\frac{\Theta_D}{T}\right) - \frac{\Theta_D}{T} D'\left(\frac{\Theta_D}{T}\right) \right\};$$

$$D(x) \equiv \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{z^3 dz}{e^z - 1}, \quad (2)$$

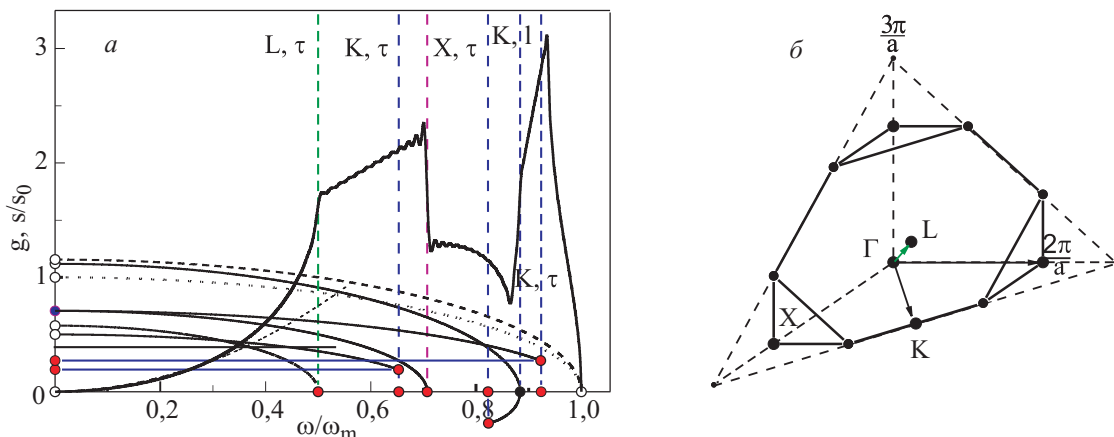


Рис. 1. Фононная плотность состояний (жирная сплошная линия) и частотные зависимости групповых скоростей фононных мод (тонкие линии) вдоль главных высокосимметричных кристаллографических направлений ГЦК кристалла с центральным взаимодействием ближайших соседей (сплошные линии — вдоль направления ГК; штриховые — вдоль направления ГЛ; штрих-пунктирные — вдоль ГХ (а); первый октант первой зоны Бриллюэна ГЦК кристаллической решетки  $s_0 = (a\omega_m)/4$  (б),  $a$  — постоянная решетки.

где теплоемкость определяется из эксперимента или микроскопического расчета по формуле

$$C_v(T) = 3R \int_0^{\omega_m} \left( \frac{\hbar\omega}{2kT} \right)^2 \text{sh}^{-2} \left( \frac{\hbar\omega}{2kT} \right) g(\omega) d\omega \quad (3)$$

(разумеется, при  $g(\omega) = g_D^{(3)}(\omega)$  выражения (2) и (3) совпадают, при этом  $\omega_D = \omega_m$ ).

Так ГЦК кристаллу с центральным взаимодействием ближайших соседей (рис. 2,а, кривая 1) соответствует зависимость  $\Theta_D(T)$ , представленная как кривая 1 на рис. 2,б. Обращает на себя внимание сильная зависимость  $\Theta_D$  от температуры при  $T \ll \Theta_D$ . Это характерно для очень большого числа соединений (см., например, [47]). В то же время при низких температурах основной вклад в теплоемкость обеспечивают длинноволновые фононы со звуковым законом дисперсии. На первый взгляд, в низкотемпературном интервале зависимость  $C_v(T)$  должна хорошо описываться формулой (2), и дебаевская температура должна мало отличаться от величины  $\Theta_D^{(0)} \equiv \hbar\omega_D/k$ .

Чтобы выяснить причину сильной температурной зависимости  $\Theta_D$  при  $T \ll \Theta_D$ , рассмотрим функцию  $\Theta_D(T)$  для системы, фононная плотность состояний которой представляет собой линейную комбинацию функции  $g_D^{(3)}(\omega)$  (штриховая линия на рис. 2,а) и эйнштейновской плотности состояний  $\delta(\omega - \omega^*)$  для частоты первой особенности Ван Хова (линия 2 на том же фрагменте). Полученная зависимость  $\Theta_D(T)$  представлена как кривая 2 на рис. 2,б. Ее вполне удовлетворительное совпадение с кривой  $\Theta_D(T)$  для ГЦК кристалла, а именно быстрый спад при  $T \leq 0,1\Theta_D^{(0)}$  и особенно совпадение минимумов (как по температуре, так и по величине) позволяют утверждать, что зависимость  $\Theta_D(T)$  можно объяснить изменением характера распространения фононов на частоте пер-

вой особенности Ван Хова — появлением, наряду с быстро распространяющимися акустическими фононами, локализованных состояний. Учет размытия эйнштейновского уровня, как видно на рис. 2 (кривые 3 (а) и (б)), несколько улучшает аппроксимацию функции  $\Theta_D(T)$  при низких температурах.

При  $\omega < \omega^*$  с ростом частоты средняя групповая скорость фононов плавно уменьшается, а при  $\omega = \omega^*$  ее дальнейшее уменьшение происходит скачком. Таким образом, в идеально упорядоченном кристалле частота первой особенности Ван Хова фактически является границей раздела между быстрыми и замедленными фононами («пропагонами» и «диффузонами», в терминах работы [37]), и ее можно рассматривать как аналог кроссовера Иоффе–Регеля в регулярной кристаллической системе.

Бозонные пики как максимумы на отношении  $g(\omega)/\omega^2$  имеет смысл рассматривать только при  $\omega < \omega^*$ , поскольку максимум на этом отношении, соответствующий первой особенности ван Хова, имеет место всегда. В данном частотном интервале («пропагонной зоне») фононную плотность можно аппроксимировать параболой, а ее отклонение от дебаевской плотности  $g_D^{(3)}(\omega)$  выразить через зависимость от частоты величины  $\omega_D$ , т.е. записать фононную плотность в форме, аналогичной (1). При  $q = 3$  имеем

$$g(\omega) \equiv \frac{3\omega^2}{\omega_D^3(\omega)} \quad (4)$$

Тогда, используя определение  $\omega_D$  (см., например, [48]), отношение фононной плотности к квадрату частоты можно выразить через дисперсии звуковых скоростей  $s_i(\omega)$

$$\frac{g(\omega)}{\omega^2} \equiv \frac{3}{\omega_D^3(\omega)} = \frac{V_0}{6\pi^2} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{s_i^3(\omega)} \quad (5)$$

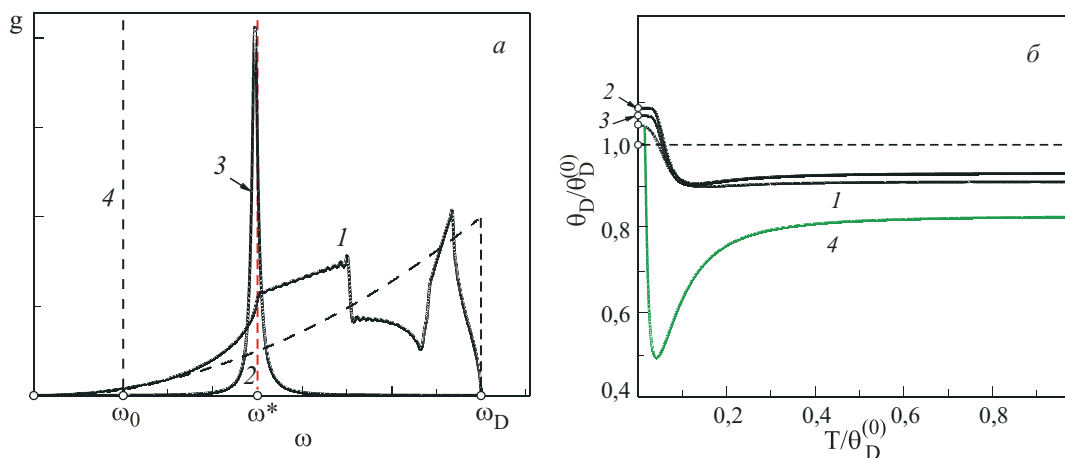
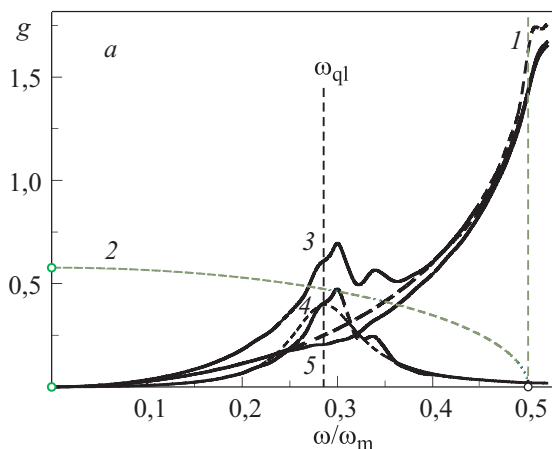


Рис. 2. Связь температурной зависимости температуры Дебая с характером распространения длинноволновых фононов в кристалле. Кривые 1 (а) и (б) соответствуют ГЦК кристаллу с центральным взаимодействием ближайших соседей; кривые 2–4 — суперпозиция дебаевской плотности состояний с локализованными и квазилокализованными модами 2–4 соответственно.

( $V_0$  — объем элементарной ячейки). Таким образом, возникновение максимума на отношении  $g(\omega)/\omega^2$  обусловлено дополнительной дисперсией скоростей звука, причиной которых могут быть неоднородности структуры, являющиеся источником квазилокализованных колебаний — дефекты, сложная структура элементарной ячейки, вращательные степени свободы узлов кристаллической решетки и т. п.

Такая дополнительная дисперсия скоростей звука должна проявиться в поведении температурной зависимости  $\Theta_D(T)$ . Если на частотной зависимости отношения  $g(\omega)/\omega^2$  дополнительное «торможение» звуковых волн формирует максимум, то на кривой  $\Theta_D(T)$  должен возникать низкотемпературный минимум, причем большей глубины, чем на кривых 1–3, представленных на рис. 2,б. Такой минимум имеет место на кривой 4 на рис. 2,б. Эта кривая — температурная зависимость дебаевской температуры, соответствующей наличию в фоновом спектре  $g_D^{(3)}(\omega)$ , кроме квазилокализованного возмущения, представленного кривой 3 на рис. 2,а, дополнительного резонансного уровня с частотой  $\omega_0 = \omega_D/5$  (линия 4 на том же фрагменте). Минимум на зависимости  $\Theta_D(T)$  может проявляться и в том случае, когда максимум на отношении  $g(\omega)/\omega^2$  не наблюдается, так как не попадает в «пропагонную» область.

В следующих разделах статьи рассмотрены проявления бозонных пиков и кроссовера Иоффе–Регеля в фоновых спектрах твердых растворов и некоторых других гетерогенных структур, как неупорядоченных, так и обладающих кристаллической регулярностью в расположении атомов. Продемонстрирована их связь с дополнительной дисперсией длинноволновых акустических фононов и влияние этой дополнительной дисперсии на температурную зависимость дебаевской температуры.



## 2. Взаимодействие акустических фононов с квазилокализованными состояниями

Хорошо известно (см, например [5–7]), что тяжелые или слабосвязанные примеси могут формировать в низкочастотной части полосы квазинепрерывного спектра (ее «пропагонной зоне») максимумы на фоновой плотности состояний, так называемые квазилокальные колебания. Распространение таких колебаний происходит с очень малыми скоростями, и может быть представлено в виде волн типа сферических:

$$\rho(\omega, \mathbf{r}) = \frac{1}{\pi} \text{Im } G(\omega, \mathbf{r}) \quad (6)$$

( $G(\omega, \mathbf{r})$  — функция Грина, соответствующая смещению атома с радиус-вектором  $\mathbf{r}$ ), которые качественно отличаются от спектральных плотностей атомов основной решетки, в том числе и соседних с примесью. Они имеют квазирезонансный вид, и на них никак не проявляются особенности типа особенностей Ван Хова. Так, на рис. 3 изображены низкочастотные ( $\omega \leq \omega_m/2$ ) области фоновых спектров твердых растворов тяжелой изотопической примеси  $m'/m = 4$  (а) и примеси, которая в четыре раза слабее связана с основной решеткой, чем атомы основной решетки связаны между собой (б). На обоих фрагментах рисунка показаны фоновая плотность идеального кристалла (ГЦК кристаллической решетки с центральным взаимодействием ближайших соседей — штриховые кривые 1), а также частотная зависимость поперечной скорости звука в направлении ГЛ, обращение которой в нуль определяет положение первой особенности Ван Хова (кривые 2). Кривые 1 и 2 (с теми же обозначениями) приведены также на рис. 4 и 5.

В обоих случаях концентрация примеси  $p = 5\%$ . Видно, что на фоновых плотностях (кривые 3) формируются низкочастотные максимумы — квазило-

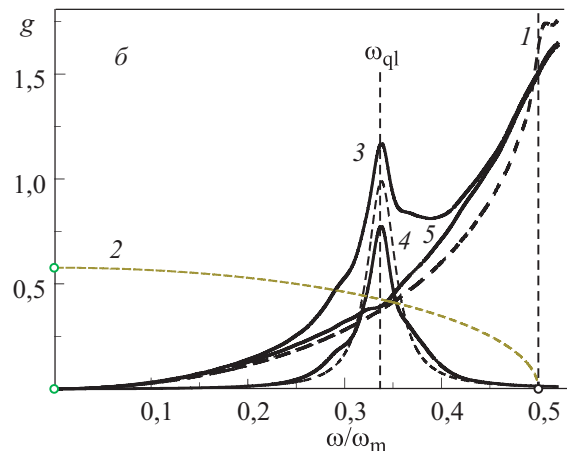


Рис. 3. Низкочастотные части спектров пятипроцентных твердых растворов тяжелой изотопической примеси (а) и примеси с ослабленным силовым взаимодействием (б). Фоновые плотности идеальной решетки (1); частотная зависимость поперечной скорости звука вдоль направления ГЛ (2); фоновые плотности раствора (3); вклады в эти плотности от примесных атомов и атомов кристалла-матрицы (4), (5).

кальные колебания. Для слабосвязанной примеси квазилокальный максимум имеет отчетливо выраженный резонансный характер. Кривые 4 на обоих фрагментах соответствуют вкладу в фононную плотность примесных атомов  $g_{\text{imp}}(\omega)$ . Данные кривые незначительно отклоняются от изображенных рядом с ними в виде штриховых линий частотных зависимостей, умноженных на концентрацию спектральной плотности изолированного примесного атома  $p\rho(\omega, \mathbf{r})$ . Функция  $g_{\text{imp}}(\omega)$  отлична от нуля только вблизи максимума на кривой  $\rho(\omega, \mathbf{r})$  — квазилокальной частоты  $\omega_{ql}$ . Поэтому квазилокальные колебания можно представить как медленно расходящиеся от примеси волны типа сферических.

Кривые 5 на обоих фрагментах рисунка представляют функции  $g(\omega) - g_{\text{imp}}(\omega)$ , т.е. вклады в фононную плотность раствора от колебаний атомов основной решетки. При частотах  $\omega < \omega_{ql}$  эти колебания распространяются в виде плоских волн и соответствующие участки на кривых 5 гладкие и имеют параболический (квазидебаевский) вид. При частотах вблизи  $\omega_{ql}$  плоские волны рассеиваются на медленных расходящихся от примесей волнах. При этом на частотной зависимости  $g(\omega) - g_{\text{imp}}(\omega)$  формируется излом, похожий на излом при частоте первой особенности Ван Хофа  $\omega^*$ . Природа обеих этих особенностей сходна — это рассеяние быстрых акустических фононов на медленных фононах.

Таким образом, влияние тяжелых или слабосвязанных с атомами основной решетки примесных атомов на фононный спектр и колебательные характеристики сводятся к формированию квазилокальных колебаний (кривые 4), обусловленных собственно колебаниями примесей, и к рассеянию на этих колебаниях быстрых акустических фононов, формируемых колебаниями

атомов основной решетки. Изломы на кривых 5 фактически являются проявлениями кроссовера Иоффе–Регеля, однако в данном случае эти особенности «спрятаны» под квазилокальными максимумами.

Обнаружить такие особенности можно на системах, в которых ослабление межатомного взаимодействия не сопровождается формированием квазилокальных мод, или на системах, в которых квазилокальные колебания примесных атомов имеют частоты, лежащие выше  $\omega^*$ . Примером систем первого типа являются кристаллы с дефектами типа ослабления силовых связей. Так, на рис. 4 изображены низкочастотные части фононных плотностей состояний (а) и температурные зависимости  $\Theta_D$  (б) для ГЦК кристаллической решетки, у которой 5% силовых связей ослаблены в 4 и в 8 раз (соответственно кривые 3 и 4 на обоих фрагментах). На рис. 4,а также представлены зависимости  $(g(\omega)/4)(\omega_m/\omega)^2$  (кривые 3' и 4' соответственно), на которых отклонение фононной плотности состояний от дебаевского вида проявляется более отчетливо. Видно, что фононные плотности начинают качественно отличаться от  $g^{(3)}(\omega)$ , начиная с частот  $\omega = \omega_{ql}^{(4)}$  (кривая 3) и  $\omega = \omega_{ql}^{(8)}$  (кривая 4), т.е. с квазилокальных частот, соответствующих наличию в решетке изолированной слабосвязанной примеси ( $\alpha'/\alpha = 1/4$  и  $\alpha'/\alpha = 1/8$  соответственно). Возбуждение медленно распространяющихся волн, имеющих такую частоту, свидетельствует о присутствии в системе атомов, у которых ослаблено несколько связей (по крайней мере, две, вдоль одной прямой), т.е. формированию дефектных кластеров (или примесных молекул). Примером такого дефектного кластера может служить изолированная примесь замещения с измененными силовыми связями (в этом случае ближайшие соседи примеси также являются дефектными атомами). Минимальный размер такого дефектного кластера равен двум межатомным расстояниям.

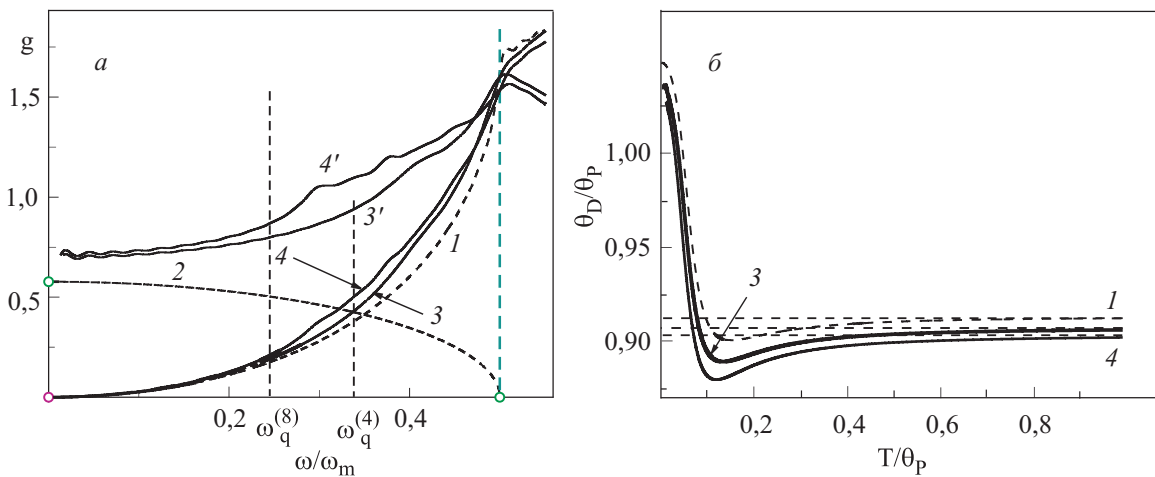


Рис. 4. Низкочастотные части фононных спектров (а) и температурные зависимости  $\Theta_D$  (б) ГЦК кристаллов, 5% силовых связей которых ослаблены. Штриховые линии 1 и 2 соответствуют фононной плотности и частотной зависимости скорости звука в направлении ГЛ для идеального кристалла. Линии 3 — фононные плотности (а) и  $\Theta_D(T)$  (б) для случая ослабления связей в 4 раза; линии 4 — в 8 раз. Линии 3' и 4' — отношения плотности состояний к квадрату частоты  $\Theta_P = \hbar\omega_m/k$ .

Отклонение в области низких частот фононной плотности состояний от  $g_D^{(3)}(\omega)$  должно заметным образом повлиять на поведение низкотемпературных термодинамических характеристик. На рис. 4,б отчетливо видно, что на кривых 3 и 4, которые представляют зависимости  $\Theta_D(T)$  для кристаллов с ослаблением 5% силовых связей в 4 и 8 раз, имеются заметные низкотемпературные минимумы, которые указывают на замедление акустических фононов как за счет их локализации на слабых связях, так и за счет дополнительного рассеяния фононов, оставшихся делокализованными на образовавшихся квазилокализованных состояниях.

На рис. 5 аналогичные зависимости приведены для 5% (кривые 3 и 3'), а также 25% (кривые 4 и 4') твердых растворов легкой слабосвязанной примеси ( $m'/m = \alpha'/\alpha = 1/4$ ). На кривой 4' имеется отчетливый максимум, который можно трактовать как проявление бозонного пика. Причем его частота совпадает с квазилокальной частотой  $\omega_{ql}^{(4)}$ , возбуждаемой в кристалле изолированной примесью замещения, связанной с окружающими атомами в 4 раза слабее, чем атомы основной решетки. В рассматриваемой системе такие колебания характерны для атомов основной решетки, имеющих своими соседями несколько легких слабосвязанных примесей, т.е. атомов, ставших, благодаря своему соседству с примесями, слабосвязанными дефектами. При 25% концентрации легких слабосвязанных примесей число таких дефектных атомов уже достаточно велико, при 5% вероятность их формирования еще мала.

На рис. 5,б, где представлены соответствующие зависимости  $\Theta_D(T)$ , на кривой 3 виден достаточно заметный минимум, что указывает на высокую чувствительность низкотемпературной теплоемкости на замедление распространения длинноволновых акусти-

ческих фононов. Температура и величина минимума на кривой 4 совпадают с аналогичными величинами на кривой 1', представляющей зависимость  $\Theta_D(T)$  для 5% раствора слабосвязанных примесей. Следовательно, в 25% растворе легких слабосвязанных примесей формируется ~5% слабосвязанных дефектов.

Высокая чувствительность низкотемпературной теплоемкости к замедлению длинноволновых акустических фононов ярко проявляется в случае, когда ослаблено не столько взаимодействие примесей с атомами основной решетки, сколько взаимодействие между примесями замещения в матрице основной решетки. Примером такой системы является твердый раствор  $Kr_{1-p}Ar_p$ . Криптон и аргон хорошо растворяются друг в друге, и концентрация  $p$  может принимать любое значение от нуля до единицы. Аргон легче криптона в  $\approx 2,09$  раз, а взаимодействие примеси аргона с атомами криптона (при малых концентрациях Ar) немногим меньше, чем взаимодействие атомов криптона между собой, т.е. изолированная примесь Ar в матрице Kr ведет себя практически как легкий изотоп. В то же время взаимодействие примесей аргона в матрице криптона между собой слабее взаимодействия между атомами криптона более чем в пять раз [49].

На рис. 6 приведены фононные плотности чистых криптона и аргона (штриховые линии), твердого раствора  $Kr_{0,756}Ar_{0,244}$ , а также зависимости  $\Theta_D(T)$  для данных систем. При такой концентрации фононный спектр раствора формируется, с одной стороны, ростом числа высокочастотных состояний [50] за счет изолированных примесей, а также дефектных кластеров размером менее двух межатомных расстояний. В таких кластерах не образуются слабосвязанные примеси аргона и не формируются обусловленные ими квазилокальные колебания. С другой стороны, при  $p \approx 25\%$  (как было показано в предыдущем случае) образуется

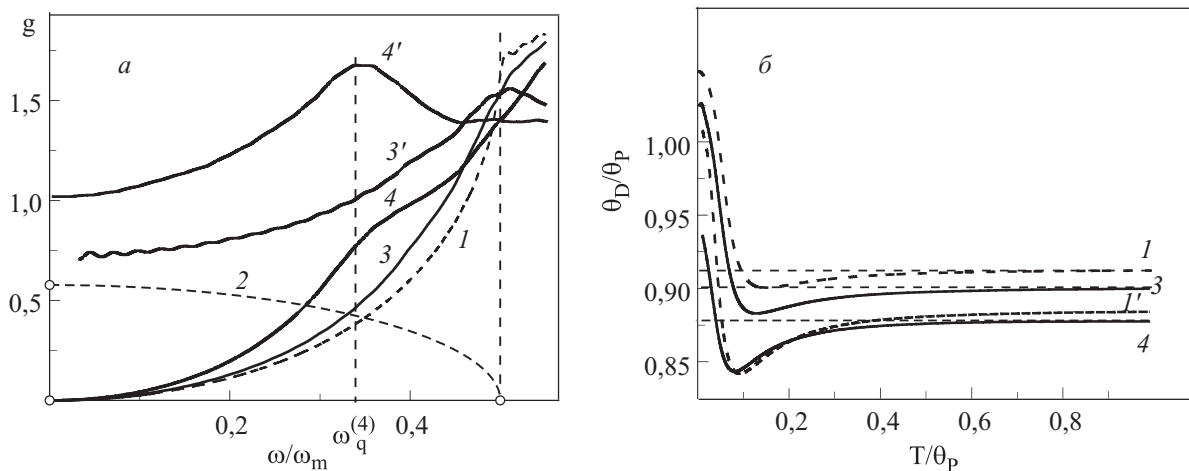


Рис. 5. Низкочастотные части фононных спектров (а) и температурные зависимости  $\Theta_D(T)$  (б) твердых растворов легкой слабосвязанной примеси в ГЦК кристалле. Обозначения аналогичны принятым на рис. 4 при  $p, \%$ : 5 (3) и (3'), 25 (4) и (4'). Кривая 1' (б) соответствует 5% раствору слабосвязанных примесей.

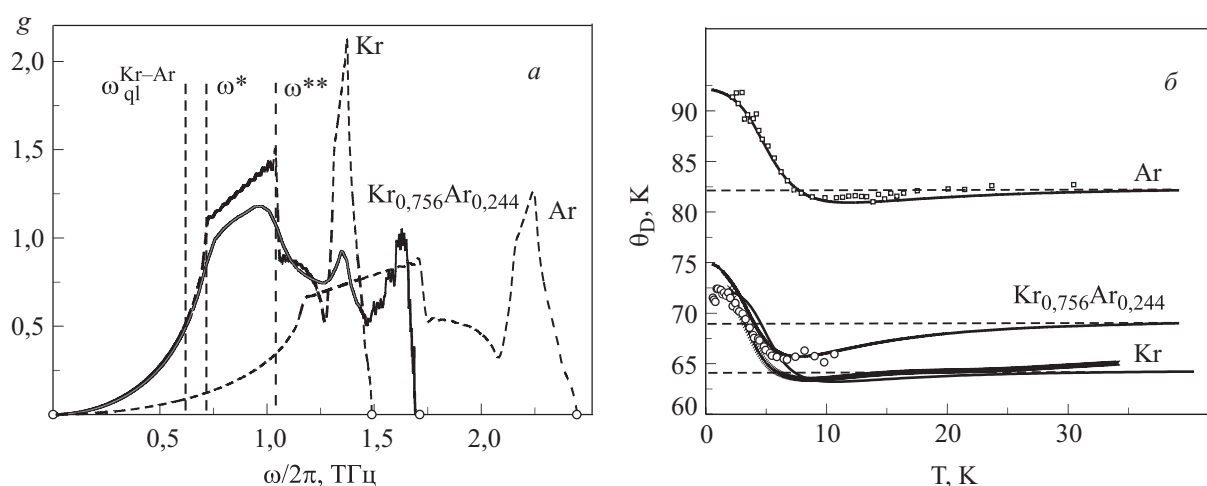


Рис. 6. Фононные плотности (а) и температурные зависимости дебаевской температуры (б) для криптона, аргона и твердого раствора  $Kr_{0,756}Ar_{0,244}$ . Сплошные линии — результат расчета, точки — расчет по экспериментальным данным по измерению теплоемкости [49,50] (б).

достаточно большое число более крупных дефектных кластеров, которые формируют подобные квазилокальные колебания. Вместе с тем (в отличие от предыдущего случая) частота этих квазилокальных колебаний  $\omega_{ql}^{Kr-Ar}$  лишь немногим меньше частоты первой особенности Ван Хофа криптона  $\omega^*$  ( $\omega_{ql}^{Kr-Ar} \approx 0,86\omega^*$ ). Поэтому ни на фоновой плотности раствора, ни на ее отношении к квадрату частоты никакие особенности не проявляются.

Расширение по сравнению с криптоном полосы квазинепрерывного спектра происходит у раствора, как видно на рис. 6, главным образом, за счет фононов с частотами, лежащими в интервале  $[\omega^*, \omega^{**}]$  (т.е. «диффузюнов»). При этом на большей части частотного интервала  $[0, \omega^*]$  фононные плотности раствора и чистого криптона практически совпадают. Такое перераспределение фононных частот приводит к характерному двуэкстремальному поведению температурной зависимости относительного изменения низкотемпературной теплоемкости [49], максимум на которой свидетельствует о дополнительном торможении длинноволновых акустических фононов на медленных фононах, соответствующих квазилокальным колебаниям слабосвязанных атомов аргона. Это, как и в ранее рассмотренных случаях, обуславливает формирование заметного минимума на температурной зависимости величины  $\Theta_D$ . На рис. 6, б приведены зависимости  $\Theta_D(T)$  для чистых криптона и аргона, а также для раствора  $Kr_{0,756}Ar_{0,244}$ . Температурные зависимости дебаевской температуры восстановлены для значений теплоемкости как рассчитанных теоретически (сплошные линии), так и определенных экспериментально [49] (точки). Видно, что результаты теоретического расчета демонстрируют хорошее согласие с экспериментом, в частности, вблизи минимума на зависимости  $\Theta_D(T)$  раствора.

Представленные в настоящем разделе результаты позволяют сделать вывод о высокой чувствительности низкотемпературной теплоемкости и соответственно температурной зависимости величины  $\Theta_D$  не только к образованию квазилокализованных состояний, но и к уменьшению скорости распространения длинноволновых акустических фононов за счет их рассеяния на этих состояниях. Для того, чтобы результаты такого замедления отчетливо проявились в виде бозонных пиков на отношении  $g(\omega)/\omega^2$  или дополнительных сингулярностей типа особенностей Иоффе—Регеля в частотном интервале  $[0, \omega^*]$  для дефектов типа локального ослабления межатомных взаимодействий или легких слабосвязанных примесей, необходимо выполнение следующих условий. Во-первых, частота рассеивающих квазилокальных колебаний должна быть достаточно низкой, т.е. «мощность дефекта» должна быть достаточно большой. Во-вторых, размер дефектного кластера должен быть достаточно большим (не менее двух межатомных расстояний), для чего требуется достаточно высокая  $\sim 15\text{--}20\%$  концентрация дефектов. Второе условие означает появление в системе еще одного параметра размерности длины  $l \sim 2\pi s_0/\omega > a_0$  [40] ( $a_0$  — межатомное расстояние). Этот параметр играет в нашем случае роль параметра разупорядочения.

### 3. Низкочастотные особенности фононных спектров слоистых кристаллов со сложной решеткой

В предыдущем разделе было показано, что низкочастотные особенности фононных спектров, определяющие их отличие от дебаевского вида, обусловлены рассеянием быстрых длинноволновых акустических



фононов на квазилокализованных колебаниях, волнах, медленно расходящихся от какого-либо узла. Источником таких квазилокализованных колебаний являются различные неоднородности структуры, характерный размер которых должен составлять, как минимум, несколько межатомных расстояний. При этом, вообще говоря, совершенно необязательно, чтобы эти неоднородности нарушали кристаллическую регулярность расположения атомов (т.е. были дефектами). В природе существует огромное число соединений со сложными кристаллическими решетками, элементарные ячейки которых содержат большое число атомов. Если силовое взаимодействие между каким-либо из атомов одной элементарной ячейки существенно слабее взаимодействия между ячейками, в фоннном спектре кристалла возникают оптические ветви, частоты которых существенно ниже дебаевской частоты данного соединения. Эти оптические ветви могут пересекать акустические, обуславливая появление на фоннной плотности состояний дополнительных особенностей при частотах, меньших частоты первой особенности Ван Хова.

Наличие в фоннном спектре низколежащих оптических мод присуще многим сильно анизотропным слоистым кристаллам (см., например, [51–53]). Сразу отметим, что отклонение фоннного спектра таких соединений в области низких частот может быть также обусловлено как проявлением их квазинизкоразмерной структуры [54], так и возможным влиянием изгибной жесткости отдельных слоев [55]. Однако пересечение низколежащих оптических мод с акустическими присуще большому числу слоистых структур, в том числе и таких, в низкочастотной области фоннного спектра которых не проявляются ни квазинизкоразмерные особенности, ни изгибные колебания. К числу таких структур относятся высокотемпературные сверхпроводники, диалкогениды переходных металлов, структуры на основе диоксида кобальта, ряд полимеров и биополимеров, а также многие другие природные и синтезированные материалы.

Отличительной чертой строения таких соединений является чередование слоев с сильным межатомным взаимодействием (ковалентным или металлическим) со слоями, межатомное взаимодействие в которых гораздо слабее, например ван дер Ваальсово. Поскольку это взаимодействие является слабым вдоль всех направлений, распространение длинноволновых фононов носит трехмерный характер и может характеризоваться, в частности, температурной зависимостью величины  $\Theta_D$ , определяемой с помощью формул (2), (3).

Рассмотрим в качестве модели систему, образованную на базе ГЦК кристаллической решетки путем ее «расслоения» вдоль оси [111] на структуру типа ... — B — B — A — B — B — A — B — B — ... . В этом

случае и атомы типа A, и атомы типа B образуют плотноупакованные слои. При описании межатомного взаимодействия по-прежнему ограничимся центральным взаимодействием ближайших соседей. Взаимодействие между атомами типа B (как лежащими в одном слое, так и в разных слоях) будем считать одинаковым и вдвое меньшим, чем взаимодействие между атомами A и атомами разных типов (эти взаимодействия будем считать одинаковыми).

Фоннный спектр рассматриваемой модели содержит девять ветвей (три акустических и шесть оптических), причем оптические моды не отделены от акустических щелью. Частоты всех фононов, поляризованных вдоль оси [111] (далее эту ось будем обозначать как ось  $c$ , ось [110] — как ось  $a$  и ось [112] — как ось  $b$ ), лежат в низкочастотной области. При  $k=0$  две оптические моды имеют низкие частоты, которые соответствуют изменению топологии изочастотных поверхностей (от замкнутых к открытым вдоль оси  $c$ ) для поперечных и продольных мод соответственно. Таким образом, эти частоты играют роль частот Ван Хова  $\omega^*$ . На рис. 7 и 8 данные частоты обозначены вертикальными штриховыми линиями  $\omega_\tau^*$  и  $\omega_l^*$ .

На рис. 7 представлены спектральные плотности (6), соответствующие смещениям атомов A и B вдоль оси  $c$  и в базисной плоскости  $ab$  (кривые 1). Нормировка каждой из спектральных плотностей соответствует ее вкладу в полную фоннную плотность состояний  $g(\omega)$ , приведенную на рис. 8, а

$$g(\omega) = \frac{2}{9} \rho_{ab}^{(A)}(\omega) + \frac{1}{9} \rho_c^{(A)}(\omega) + \frac{4}{9} \rho_{ab}^{(B)}(\omega) + \frac{2}{9} \rho_c^{(B)}(\omega). \quad (7)$$

На рис. 7 представлены также величины, пропорциональные отношению соответствующих спектральных плотностей к квадрату частоты (кривые 2). Коэффициенты пропорциональности выбраны из соображений удобства размещения этих кривых в той же координатной сетке, что и соответствующая спектральная плотность.

На функциях  $\rho_c^{(A)}(\omega)$  и  $\rho_c^{(B)}(\omega)$  (и на их отношениях к  $\omega^2$ ) имеются ярко выраженные особенности при  $\omega = \omega_\tau^*$ , а также при некоторой частоте  $\omega_c$ , лежащей ниже  $\omega_\tau^*$ . Эта частота соответствует пересечению продольной акустической моды, поляризованной вдоль оси  $c$ , с оптической модой поперечной поляризации, которая распространяется в том же направлении. Скорость звука в данной акустической моде  $s_l^{(c)} \sim \sqrt{C_{33}}$  (в рассматриваемой модели для упругих модулей  $C_{ik}$  выполняются соотношения  $C_{11} = 2,125C_{33} = 3C_{66} = 7,5C_{44}$ ). Максимальная частота оптической моды равна  $\omega_\tau^*$ .

На спектральных плотностях  $\rho_{ab}^{(A)}(\omega)$  и  $\rho_{ab}^{(B)}(\omega)$  имеются дополнительные особенности при частотах  $\omega_{ab}^{(\tau)} < \omega_\tau^*$  и  $\omega_{ab}^{(l)} \in (\omega_\tau^*, \omega_l^*)$ . Эти особенности связаны с пересечением акустических ветвей с низкочастотной

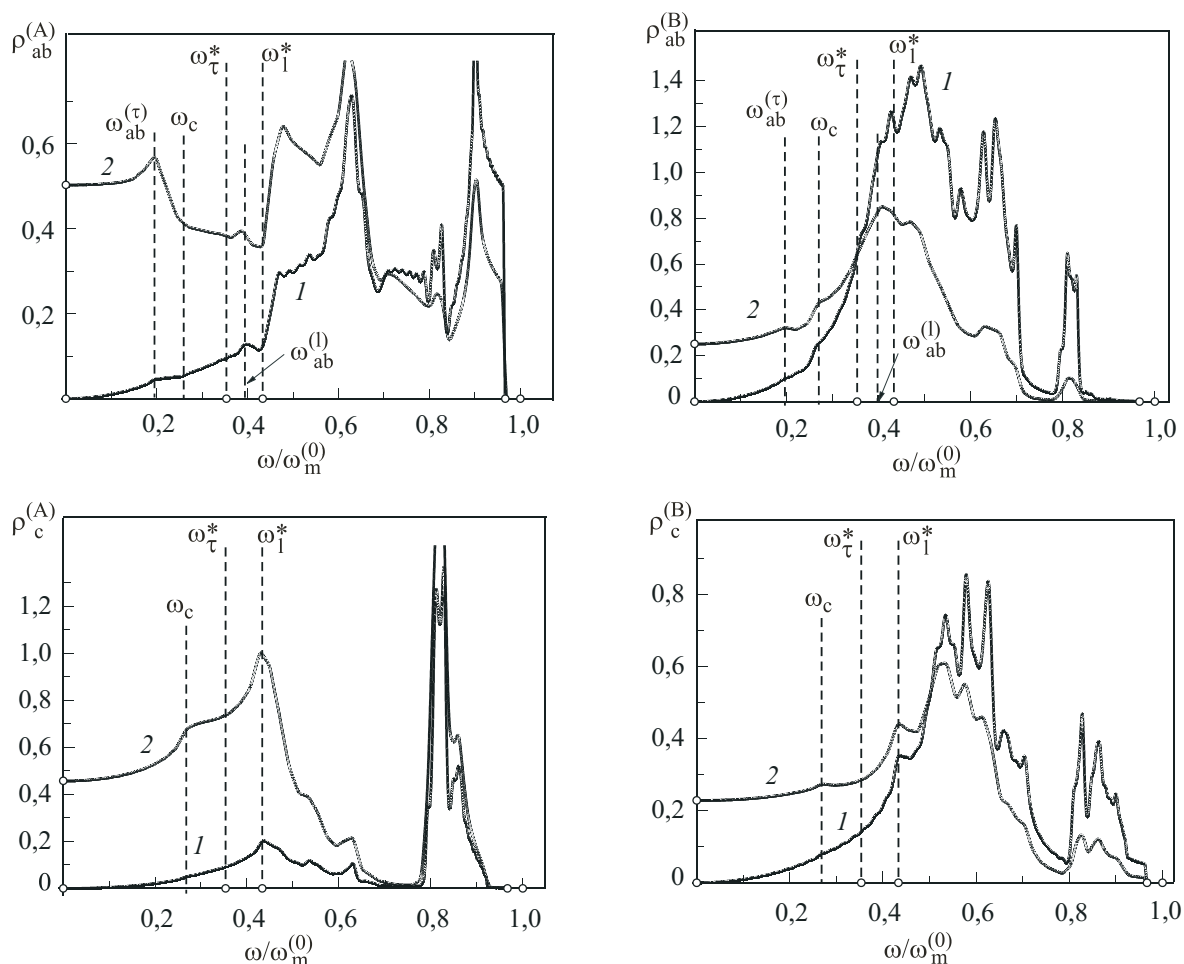


Рис. 7. Спектральные плотности (кривые 1) и их отношение к квадрату частоты (кривые 2), соответствующие смещениям атомов различных подрешеток рассматриваемой структуры вдоль различных кристаллографических направлений.

оптической модой, которая поляризована вдоль оси  $c$ . В базисной плоскости распространяются три существенно отличающиеся друг от друга акустические волны — продольная ( $s_l \sim \sqrt{C_{11}}$ ) и две поперечные: поляризованная в базисной плоскости ( $s_\tau \sim \sqrt{C_{66}} = s_l/\sqrt{3}$ ) и поляризованная вдоль оси  $c$  ( $s_n \sim \sqrt{C_{44}} = s_l/\sqrt{7,5}$ ). Две первые акустические моды пересекают низкочастотную оптическую. В этой оптической моде частота колебаний при  $k=0$  равна  $\omega_l^*$ , а на границе первой зоны Бриллюэна (в точке  $K$ ) она стыкуется с самой медленной акустической модой, поляризованной вдоль оси  $c$ . Таким образом, эта мода обладает заметной дисперсией, что обуславливает как малость значения  $\omega_{ab}^{(\tau)}$  (частота  $\omega_{ab}^{(\tau)} < \omega_c$ , так как  $s_\tau < s_l^{(c)}$ ), так и размытость особенности вблизи  $\omega_{ab}^{(l)}$ .

Отметим, что пересечение низкочастотных оптических мод с акустическими является хорошо установленным фактом для многих слоистых кристаллов с многоатомными элементарными ячейками (см., например, [51,52]).

Как отчетливо видно на рис. 7 (кривые 1 и 2), все спектральные плотности в достаточно широкой области низких частот  $\propto \omega^2$ , т.е. для фоновой спектра

и обусловленных им термодинамических величин при низких температурах должно быть характерным обычное трехмерное поведение. Поэтому низкочастотные особенности на фоновой плотности состояний могут быть описаны в терминах отклонения плотности состояний от  $g_D^{(3)}(\omega)$ , в частности, как температурная зависимость дебаевской температуры, которую можно рассчитать по формулам (2), (3).

На рис. 8 представлены: фоновая плотность состояний (7) (а) и температурная зависимость величины  $\Theta_D$  рассматриваемой модели (б), а также, для сравнения, аналогичные характеристики «исходной» ГЦК решетки (решетки атомов типа  $A$ ). Ослабление (по сравнению с решеткой  $A$ ) некоторых силовых связей приводит к росту фоновой плотности состояний в области низких частот и, следовательно, к уменьшению дебаевской температуры. Наличие особенностей, которые связаны с замедлением быстрых акустических фононов из-за их рассеивания на медленных оптических, обуславливает формирование на зависимости  $\Theta_D$  отчетливо выраженного низкотемпературного минимума.

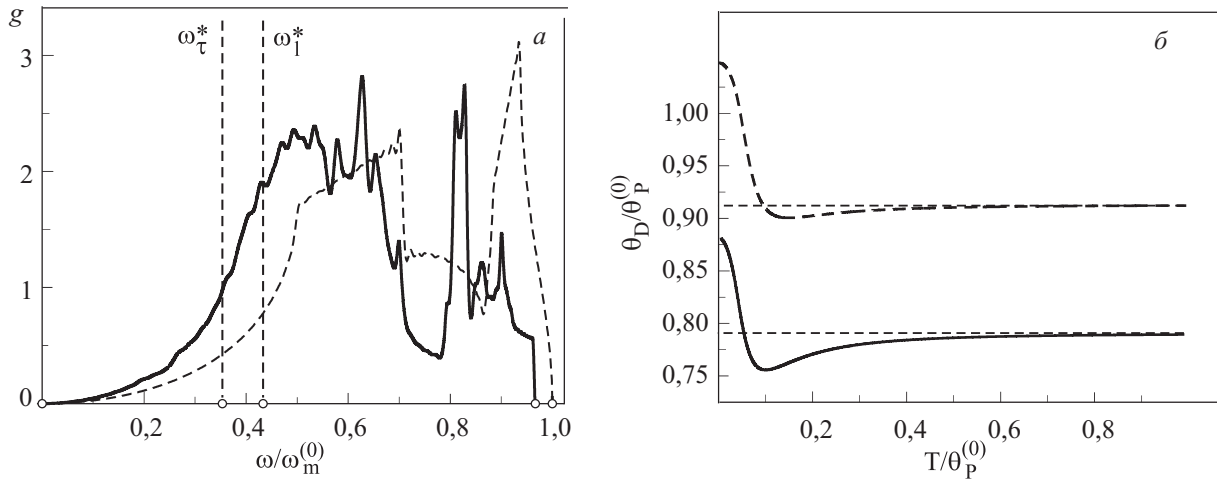


Рис. 8. Фононная плотность состояний (а) и температурная зависимость  $\Theta_D$  (б) слоистого кристалла с трехатомной элементарной ячейкой (сплошные кривые) в сравнении с аналогичными характеристиками идеальной ГЦК решетки с центральным взаимодействием ближайших соседей (штриховые кривые).

Таким образом, в кристаллических упорядоченных гетерогенных структурах возможно рассеяние быстрых акустических фононов на медленных оптических. Это рассеяние, аналогичное рассеянию таких фононов на квазилокализованных колебаниях в неупорядоченных системах, приводит к образованию аналогичных низкочастотных особенностей на фононных плотностях состояний, которые подобным образом проявляются в поведении низкотемпературных колебательных характеристик. Природа возникновения и характер проявления этих особенностей дают все основания отождествить их с проявлениями кроссовера Иоффе–Регеля. Отметим, что данные особенности полностью аналогичны рассмотренным в [39,40].

### Выводы

На основе полученных в предыдущих разделах результатов можно заключить, что природа особенностей Иоффе–Регеля в неупорядоченных системах аналогична природе формирования первой особенности Ван Хофа в структурах с кристаллической регулярностью в расположении атомов.

Особенность Иоффе–Регеля, определяемая как граница раздела между быстро распространяющимися фононами («пропагонами») и фононами более медленными («диффузонами») [40], соответствует длине волны быстро распространяющихся фононов, при которых эти фононы начинают чувствовать дефектную структуру.

Частота первой особенности Ван Хофа  $\omega^*$  соответствует такой длине волны быстрых акустических фононов  $\lambda$ , начиная с которой (т.е. при  $\lambda < \lambda^*$ ), характер распространения таких фононов качественно меняется — на нем начинает сказываться дискретность кристаллической решетки. При этом средняя скорость и средняя длина волны акустических фононов меняют-

ся скачком. Поэтому первая особенность Ван Хофа также является границей раздела между быстрыми акустическими фононами с законом дисперсии, близким к звуковому (теми же «пропагонами»), и фононами, которые распространяются намного медленнее («диффузонами»), чей закон дисперсии отличен от звукового.

Наличие в кристалле разного рода дефектов может приводить к дополнительному замедлению быстрых акустических фононов, что при выполнении определенных условий также может проявиться в виде скачка на частотной зависимости их групповой скорости. Во втором разделе статьи показано, что эти условия сводятся к формированию в фононном спектре квазилокализованных состояний, т.е. локализованных вблизи дефекта фононов, скорости распространения которых крайне малы. Эти состояния не только могут обуславливать возникновение низкочастотных максимумов в «пропагонной» области частот исходного идеального кристалла, но и служить рассеивающими центрами для быстрых акустических фононов, соответствующих колебаниям атомов основной решетки. Показано, что эффективными рассеивающими центрами могут служить дефектные кластеры, размер которых не менее двух межатомных расстояний. Поэтому параметр  $l > 2a_0$ , который можно принять за параметр упорядочения, становится сравнимым с длиной волны (предел Иоффе–Регеля [39,40]). Только в этом случае могут формироваться квазилокализованные состояния с частотами ниже частоты первой особенности Ван Хофа  $\omega^*$ , и только в этом случае на этих квазилокальных колебаниях будут эффективно рассеиваться фононы с частотами  $\omega < \omega^*$  («пропагоны»). Такое скачкообразное уменьшение групповой скорости фононов сдвигает границу раздела «пропагонов» и «диффузонов» в область более низких частот (на частоту квазилокали-

зованного колебания  $\omega_{ql} < \omega^*$ ), и частота  $\omega_{ql}$  является частотой особенности Иоффе–Регеля для данной системы. Во втором разделе статьи показано, что формирование квазилокализованного колебания с частотой  $\omega_{ql}$  может не сопровождаться возникновением низкочастотного максимума на фононной плотности состояний.

На фононной плотности состояний трехмерных кристаллических решеток и особенности Иоффе–Регеля, и первая особенность Ван Хофа проявляются одинаковым образом — в виде излома. К таким же особенностям на плотности состояний слоистых кристаллов со сложной решеткой и других гетерогенных кристаллически упорядоченных структур приводит наличие в их фононных спектрах низкочастотных оптических мод (фононов с малой групповой скоростью). Природа таких особенностей, как было показано в третьем разделе статьи, все та же — рассеяние быстрых акустических фононов на фононах медленных.

Обогащение фононами низкочастотной области полосы квазинепрерывного спектра приводит к заметному отклонению плотности состояний от дебаевского вида. В работе показано, что это отклонение, часто проявляющееся в виде максимумов на отношении фононной плотности состояний к квадрату частоты (так называемых «бозонных пиков» или «бозонных максимумов»), обусловлено дополнительной дисперсией звуковых волн. Не менее информативной характеристикой такого перераспределения фононов по спектру является низкотемпературная теплоемкость и выражающаяся через нее температурная зависимость температуры Дебая.

Таким образом, в работе выяснены на микроскопическом уровне причины, приводящие к появлению в низкочастотной области характерных отличий фононного спектра твердых тел от дебаевского. Проанализированы те из них, которые связаны с появлением так называемого бозонного пика и кроссовера Иоффе–Регеля.

Предложенным анализом мы продолжаем исследования А.М. Косевича [39,40], которые были проведены им при изучении динамики решетки неупорядоченных твердых систем. Авторам этой работы посчастливилось много лет работать рядом с Арнольдом Марковичем Косевичем — выдающимся ученым и исключительно добрым и обаятельным человеком. Круг его научных интересов был необычайно широк, и в каждой из сфер его многогранной научной деятельности оставленный им след по настоящему ярок. Остались не только результаты, вошедшие в учебники, не только разработанные им методы, обогатившие арсенал современной теоретической физики, остались идеи, которые он не успел разработать до конца.

Одну из таких идей — о проявлении рассеяния плоских волн на волнах типа сферических в колебательных

характеристиках реальных кристаллов мы постарались частично реализовать в настоящей работе. Эту работу мы посвящаем светлой памяти Арнольда Марковича. Работа выполнена при поддержке грантов № 23/07-Н НАН Украины и № 4119 УНТЦ.

1. И.М. Лифшиц, *ДАН СССР* **48**, 83 (1945).
2. И.М. Лифшиц, *УМН* **7**, 171 (1952).
3. I.M. Lifshitz and A.M. Kosevich, *Rep. Progr. Phys.* **29**, 217 (1966).
4. I.M. Lifshitz, S.A. Gredeskul, and L.A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems*, Wiley, New York (1988).
5. А.М. Косевич, *Основы механики кристаллической решетки*, Наука, Москва (1972).
6. А.М. Косевич, *Физика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).
7. А.М. Kosevich, *The Crystal Lattice: Phonons, Solitons, Dislocations*, Wiley-VCH, Berlin (1999).
8. *Amorphous Solid-Low Temperature Properties*, W.A. Phillips (ed.), Springer, Berlin (1981).
9. N. Ahmad, K.W. Hutt, and W.A. Phillips, *J. Phys.* **C19**, 3765 (1986).
10. D. Engberg, A. Wisniewski, V. Buchenau, L. Borjesson, A.J. Dianoux, A.D. Sokolov, and L.M. Torell, *Phys. Rev.* **B59**, 4053 (1999).
11. A. Matic, D. Endberg, C. Masciovecchio, and L. Borjesson, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3803 (2001).
12. C.A. Angel, K.L. Nqai, G.B. McKenna, P.F. McMillan, and S.W. Martin, *J. Appl. Phys.* **88**, 3113 (2000).
13. M. Forett, R. Vacher, E. Courtens, and G. Monaco, *Phys. Rev.* **B66**, 024204 (2002).
14. T. Scopigno, E. Pontecorvo, R. Di Leonardo, M. Krisch, G. Monaco, G. Ruocco, B. Ruzichka, and F. Sette, *J. Phys. Condens. Matter* **15**, S1269 (2003).
15. A.I. Chumakov, I. Sergeev, U. van Burck, W. Schrimacher, T. Asthalter, R. Ruffer, O. Leupold, and W. Petry, *Phys. Rev. Lett.* **92** 245508 (2004).
16. V.G. Karpov, V.G. Klinger, and F.N. Ignat'ev, *Sov. Phys. JETP* **57**, 439 (1983).
17. V.L. Gurevich, D.A. Parshin, J. Pelous, H.R. Schrober, *Phys. Rev.* **B48**, 16318 (1993).
18. V.L. Gurevich, D.A. Parshin and H.R. Schrober, *Phys. Rev.* **B67**, 094203 (2003).
19. U. Buchenau, Yu. M. Galperin, V.L. Gurevich, D.A. Parshin, M.A. Ramos, and H.R. Schrober, *Phys. Rev.* **B46**, 2798 (1992).
20. W. Schrimacher and M. Wagener, *Solid State Commun.* **86**, 597 (1993).
21. R. Kunh and U. Horstrann, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4067 (1997).
22. W. Schrimacher and M. Wagener, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 136 (1998).
23. W. Gotze and M.R. Mayr, *Phys. Rev.* **E61**, 587 (2000).
24. S.N. Taraskin, Y.L. Loh, G. Natarajan, and S.R. Elliott, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1225 (2001).
25. J.W. Kantelhardt, S. Russ, and A. Bunde, *Phys. Rev.* **B63**, 064302 (2001).

26. E. Maurer and W. Schrimacher, *J. Low Temp. Phys.* **137**, 453 (2004).
27. T.S. Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, and P. Verrochio, *Nature* **422**, 289 (2003).
28. M. Turlakov, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 035501 (2004).
29. V. Gurarie and A. Altland, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 245502 (2004).
30. J.L. Feldman, P.B. Allen, and S.H. Bickman, *Phys. Rev.* **B59**, 3551 (1999).
31. S.N. Taraskin and S.R. Elliott, *Phys. Rev.* **B61**, 12017 (2000).
32. S.I. Simdyankin, S.N. Taraskin, M. Elenius, S.R. Elliott, and M. Dzugutov, *Phys. Rev.* **B65**, 104302 (2002).
33. R. Dell'Anna, G. Russo, M. Sampoli, and G. Viliani, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1236 (1998).
34. M.C.C. Ribeiro, M. Wilson, and P.A. Madden, *J. Chem. Phys.* **108**, 9027 (1998).
35. P. Jund and R. Jullien, *Phys. Rev.* **B59**, 13707 (1999).
36. J. Horbach et al., *Eur. Phys. J.* **B19**, 531 (2001).
37. P.B. Allen, J.L. Feldman, J. Fabian, and F. Wooten, *Philos. Mag.* **B72**, 1715 (1999).
38. S.R. Elliott, *Europhys. Lett.* **19**, 201 (1992).
39. M.I. Klinger and A.M. Kosevich, *Phys. Lett.* **A280**, 365 (2001).
40. M.I. Klinger and A.M. Kosevich, *Phys. Lett.* **A295**, 311 (2002).
41. A. Feher, I.M. Yurkin, L.I. Deich, M. Orendach, and I.D. Turyanitsa, *Physica* **B194–196**, 395 (1994).
42. S.A. Alexander and R. Orbach, *J. Phys. Lett.* **43**, 625 (1982).
43. V.K. Malinovsky, A.P. Sokolov, and V.N. Novikov, *Phys. Lett.* **A153**, 63 (1991).
44. W. Steurer, A. Apfölder, M. Koch, W.E. Ernst, B. Holst, E. Sondergard, and J.R. Manson, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 035503 (2007).
45. U. Buchenau, A. Wisschnewski, M. Ohl, and E. Fabiani, *arXiv:cond-mat/0407136, v.1, 6 July* (2004).
46. V.A. Konstantinov, V.G. Manzhelii, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, and O.I. Pursky, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 901 (2006).
47. Г. Лейбфрид, *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов*, Физматгиз, Москва (1963).
48. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1964).
49. M.I. Bagatskii, S.B. Feodosyev, I.A. Gospodarev, O.V. Kotlyar, E.V. Manzhelii, A.V. Nedzvetski, and E.S. Syrkin, *ФНТ* **33**, 741 (2007).
50. М.И. Багацкий, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **18**, 629 (1992).
51. N. Wakabayashi, H.G. Smith, and R. Shanks, *Phys. Lett.* **50A**, 367 (1974).
52. D.E. Moncton, J.D. Axe, and F.J. Di Salvo, *Phys. Rev.* **B16**, 801 (1977).
53. Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **8** (1982).
54. В.В. Тарасов, *ЖФХ* **24**, 111 (1950).
55. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **22**, 475 (1952).

Ioffe–Regel crossover and boson peaks in disordered solid solutions and similar peculiarities in heterogeneous crystal structures

I.A. Gospodarev, V.I. Grishaev, O.V. Kotlyar, K.V. Kravchenko, E.V. Manzhelii, E.S. Syrkin, and S.B. Feodosyev

The low-frequency peculiarities of phonon spectra of disordered solid solutions and heterogeneous crystal structures have been analyzed on the microscopic level. Solid solutions with only translational degrees of freedom have been studied. It is shown that there may occur boson peaks like disturbances in such solid solutions. It is found that such disturbances are mainly due to the additional dispersion of sound waves caused by disordering of solid solutions. The influence of disturbances of the boson maximum type on low temperature heat capacity has been studied. It is found that in a number of cases the heat capacity is more sensitive to these disturbances than the low-frequency phonon density of states. It is shown that anomalies like the Ioffe-Regel crossover and boson peak may also appear in heterogeneous crystal structures with a complicated lattice.

PACS: **63.20.-e** Phonons in crystal lattice;  
**63.20.Mt** Phonon–defect interaction;  
**63.22+m** Phonons in low-dimensional structures and small particles;  
**63.50.+x** Vibration states in disordered systems.

Keywords: Ioffe-Regel crossover, boson peak, disordered solid solution, Green function.